

Optimasi dan Validasi Struktur Tiga Dimensi Senyawa Kimia dengan MMFF94 untuk Pembuatan Pangkalan Data Bahan Alam Laut = Optimization and Validation of Chemical Compound's Three-Dimensional Structure with MMFF94 for Marine Natural Compound Database Establishment

Dinda Putri Mazaya, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920528727&lokasi=lokal>

Abstrak

Ekosistem laut menawarkan sumber daya ekologis yang berlimpah dan memberikan peluang besar dalam penemuan metabolit sekunder baru yang memiliki manfaat ilmiah dan kesehatan. Namun, pengembangan obat dari organisme laut sering menghadapi kendala sulitnya mendapatkan bahan komplementer yang cukup, waktu yang lama, biaya yang mahal, dan eksploitasi berlebihan terhadap sumber daya laut. Pendekatan komputasi (*in silico*) digunakan untuk mengatasi masalah tersebut dan telah menjadi alternatif yang lebih mudah diakses, lebih murah, dan lebih cepat daripada pendekatan konvensional. Pada pendekatan komputasi dibutuhkan pangkalan data dengan struktur tiga dimensi yang sesuai. Struktur tiga dimensi perlu dioptimasi dan divalidasi untuk meningkatkan validitas pangkalan data. Dalam penelitian-penelitian sebelumnya, terdapat sebanyak 770 senyawa kimia bahan alam laut yang belum dihimpun menjadi satu pangkalan data. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk mengoptimasi struktur tiga dimensi bahan alam laut dengan force field MMFF94, memvalidasi struktur tiga dimensi tersebut dengan visualisasi struktur, serta membangun pangkalan data senyawa kimia dari bahan alam laut. Pada penelitian ini, diperoleh masing-masing 760 struktur tiga dimensi dengan format file MDL Sdfile (sdf), Tripos Mol2 (mol2), Protein Data Bank (pdb), dan Protein Data Bank, Partial Charge, & Atom Type (pdbqt). Berdasarkan hasil visualisasi, struktur tiga dimensi dengan format MDL Sdfile (sdf) dan Tripos Mol2 (mol2) memberikan hasil struktur tiga dimensi dengan kerusakan paling sedikit dan sesuai dengan struktur tiga dimensi referensi.

.....Marine ecosystems offer abundant ecological resources and provide great opportunities for the discovery of new secondary metabolites that have scientific and health benefits. However, the development of marine natural compounds often faces difficulties, such as obtaining sufficient complementary materials, long time needed, high costs, and over-exploitation of marine resources. The application of the computational method (*in silico*) resolves those problems and has become a more accessible, cheaper, and faster alternative than the conventional method. The computational method requires a database with a valid three-dimensional structure. The three-dimensional structure needs to be optimized and validated to increase the validity of the database. In previous studies, 770 marine natural chemical compounds were identified and haven't been collected into one database. Therefore, this study aimed to optimize the three-dimensional structure of marine natural materials with the MMFF94 force field, validate the three-dimensional structure with structural visualization, and establish a database of marine natural compounds. In this study, 760 three-dimensional structures were obtained in the MDL Sdfile (sdf), Tripos Mol2 (mol2), Protein Data Bank (pdb), and Protein Data Bank, Partial Charge, & Atom Type (pdbqt) file format. Based on the visualization results, the three-dimensional structure with the MDL Sdfile (sdf) and Tripos Mol2 (mol2) formats gives the best results of a three-dimensional structure with the least damage and matched with the reference.